УДК 537.311.33

ОРТО-ПАРА РАСЩЕПЛЕНИЕ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ЭКСИТОНА В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Н. М. Вильданов[1], А. П. Силин

В двухзонной модели Дирака проведено исследование спектров экситонов в массивном полупроводнике в сильных магнитных полях. Получено выражение для энергии орто-пара расщепления основного состояния.

Расчеты энергии связи экситона – как аналитические, так и численные – проведены для всевозможных полупроводниковых структур и хорошо известны [1–5]. Однако до сих пор отсутствует исследование зависимости энергии связи экситона от величины энергетической щели (орто-пара расщепление) при наложении сильного магнитного поля. Это связано с тем, что обычно отношение энергии связи экситона к энергетической щели мало и маскируется другими эффектами, такими, например, как анизотропия энергетических зон, дисперсия диэлектрической проницаемости и т.п. Поэтому представляет большой интерес исследование орто-пара расщепления основного состояния экситона, вызванного конечностью энергетической щели, при наложении сильного магнитного поля. Это связано с возможной сверхтекучестью экситонов в сильном магнитном поле [6].

В настоящей работе рассматриваются узкощелевые полупроводники с изотропными энергетическими зонами и постоянной изотропной диэлектрической проницаемостью в сильных магнитных полях. В этом случае носители тока описываются уравнением Дирака [7, 8]:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = (v\hat{\alpha}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta}\Delta)\psi. \tag{1}$$

Здесь и далее $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ – матрицы Дирака; $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}_{ex}$; $\mathbf{A}_{ex}$ – внешнее электромагнитное поле; $\Delta = E_g/2$ – полуширина запрещенной зоны; ψ – огибающая волновой функции

---

[1] Московский физико-технический институт.

электрона; v – кейновский матричный элемент (квазискорость света); $v = \sqrt{\Delta/m_e} << c$; c – скорость света в вакууме; m_e – эффективная масса электрона (в этой модели масса электрона равна массе дырки $m_e = m_h$). Магнитные поля H будем считать такими, что расстояние между уровнями Ландау $e\hbar H/m_{e,h}c$ существенно превосходит характерную энергию кулоновского взаимодействия (энергию связи экситона в отсутствие магнитного поля) $E_x = \dfrac{me^4}{2\varepsilon^2\hbar^2}$, т.е. $H >> H_c = \dfrac{m^2e^3c}{\varepsilon^2\hbar^3}$. Здесь $m = m_e m_h/(m_e+m_h)$, $\hbar$ – постоянная Планка, e – заряд электрона; ε – статическая диэлектрическая проницаемость. Характерные магнитные поля H_c могут изменяться в пределах $10^4 - 10^7$ Э в зависимости от используемого полупроводника.

Задача нахождения тонкой структуры основного состояния экситона в узкощелевом полупроводнике во многом аналогична задаче о тонкой структуре позитрония [9]. Отличие состоит в том как включается взаимодействие в свободное уравнение Дирака [4, 5]. В квантовой электродинамике слагаемое, отвечающее взаимодействию с электромагнитным полем, имеет следующий вид [9]:

$$\hat{V} = \frac{e}{c}\int \hat{j}_\mu(\mathbf{r})\hat{A}^\mu(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}. \tag{2}$$

Здесь $\hat{j}_\mu = (\hat{\bar{\psi}}\gamma^\mu\hat{\psi})$ – оператор плотности тока, $\hat{\bar{\psi}} = \hat{\psi}^*\gamma^0$, $\hat{A}^\mu = (\hat{\Phi}, \hat{\mathbf{A}})$ – оператор электромагнитного поля, $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma)$ – матрицы Дирака, по четырехкомпонентному индексу делается свертка. В узкощелевых полупроводниках из-за наличия двух характерных констант размерности скорости оператор тока содержит коэффициент $\dfrac{v}{c}$ перед векторной частью (см. [4, 5])

$$j^\mu = (j^0, j^i) = (\hat{\bar{\psi}}\gamma^0\hat{\psi}, \frac{v}{c}\hat{\bar{\psi}}\gamma^\mu\hat{\psi}),$$

и слагаемое, отвечающее взаимодействию с электромагнитным полем, выглядит иначе

$$\hat{V} = e\int \hat{\psi}^*(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\Phi}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} + \frac{ev}{c}\int \hat{\bar{\psi}}(\mathbf{r})\gamma\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}. \tag{3}$$

При выводе (3) мы использовали требование градиентной инвариантности получаемого уравнения. Поскольку в полупроводниках всегда $v << c$, то следует оставить только первое слагаемое

$$\hat{V} = e\int \hat{\psi}^*(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\Phi}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}. \tag{4}$$

Сравнение (4) и (2) показывает, что при вычислении тонкой структуры экситона мы пренебренегаем запаздыванием кулоновского взаимодействия электрона и дырки, а также магнитным взаимодействием между частицами.

Для нахождения спектра связанного состояния двух частиц строится эффективный одночастичный гамильтониан, описывающий их динамику и взаимодействие с точностью до α^2 ($\alpha = e^2/\varepsilon\hbar v$) [9]. В дальнейшем мы используем систему единиц $e^2/\varepsilon = m_e/2 = m_h/2 = \hbar = 1$. Для этого рассчитывается амплитуда рассеяния электрона на дырке во втором порядке теории возмущений по α и по амплитуде рассеяния восстанавливается эффективный гамильтониан

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi,$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3 + \hat{V}_4,$$

$$\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{1}{r} - 2\mu(\hat{\mathbf{S}}\mathbf{H}),$$

$$\hat{V}_1 = -\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{4v^2} + 4\pi\mu^2\delta(\mathbf{r}), \tag{5}$$

$$\hat{V}_2 = 4\mu^2\frac{(\hat{\mathbf{S}},\hat{\mathbf{l}})}{r^3},$$

$$\hat{V}_3 = 0,$$

$$\hat{V}_4 = \frac{4}{3}\pi\mu^2\hat{\mathbf{S}}^2\delta(\mathbf{r}) + 6\frac{\mu^2}{r^3}\left(\frac{(\hat{\mathbf{S}},\mathbf{r})(\hat{\mathbf{S}},\mathbf{r})}{r^2} - \frac{1}{3}\hat{\mathbf{S}}^2\right).$$

Здесь $\hat{H}_0$ – эффективный гамильтониан, описывающий взаимодействие электрона и дырки в приближении эффективных масс без учета взаимодействия зоны проводимости и валентной зоны, $\hat{V}_1$ – поправка орбитального происхождения, $\hat{V}_2$ – спин-орбитальное взаимодействие, $\hat{V}_3$ – спин-спиновое взаимодействие (это слагаемое мало по параметру v/c для экситона), $\hat{V}_4$ – обменное (аннигиляционное) взаимодействие, ψ – трехкомпонентная волновая функция (это связано с тем, что система электрон-дырка может иметь спин как единица, так и ноль), $\hat{\mathbf{S}}$ – оператор спина, $\hat{\mathbf{l}}$ – оператор орбитального момента, $\mu = 1/2v$ – величина, аналогичная эффективному магнетону Бора в полупроводнике

$\mu^* = c\hbar/2mc$. Для применимости этого "нерелятивистского" разложения (5) необходимо, чтобы $vp_\perp << \Delta$ (где $p_\perp$ – характерный поперечный импульс экситона, порядка обратной магнитной длины, см. (6)), что эквивалентно $\Delta >> \frac{me^4}{\varepsilon^2\hbar^2}$, и в полупроводниках всегда выполняется.

Наличие в гамильтониане (4) поправок $\hat{V}_1 - \hat{V}_4$ приводит к появлению тонкой структуры экситона. Для расчета расщепления энергетических уровней нужно усреднить $\hat{V}_1 - \hat{V}_4$ по невозмущенным волновым функциям экситонных состояний с различными значениями энергии n, проекции орбитального момента m, спина S и проекции S_z. Именно для состояний с таким набором квантовых чисел поправочные члены диагональны (это существенно, так как невозмущенные состояния вырождены).

Вычислим орто-пара расщепление основного состояния экситона в сильных магнитных полях, т.е. разность энергий между состояниями с $n = 1$, $m = 0$, $S = 1$, $S_z = 0$ (орто), и $n = 1$, $m = 0$, $S = 0$, $S_z = 0$ (пара). Волновая функция $\psi_0(\mathbf{r})$ основного состояния экситона в сильных магнитных полях может быть вычислена в вариационном приближении [10]:

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\lambda} e^{-\frac{\rho^2}{4\lambda^2}} \cdot \sqrt{a} e^{-a|z|}, \tag{6}$$

где $a = lnH$ ($1/a$ – радиус экситона), $\lambda = 1/\sqrt{H}$ – магнитная длина (характерный размер экситона в направлении, перпендикулярном магнитному полю), ρ – радиус-вектор в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. При этом энергия экситона равна $E_0 = -\frac{1}{2}ln^2 H$ [11]. Мы считаем, что поле направлено по оси z и магнитный потенциал выбран в виде $\mathbf{A}_{ex} = [\mathbf{H}, \mathbf{r}]/2$. В отличие от позитрония [8] и экситона [4, 5] в отсутствие магнитного поля при наложении сильного магнитного поля главный вклад в орто-пара расщепление дает поправка к обменному (аннигиляционному) взаимодействию. Легко видеть, что среднее $\hat{V}_1$ не зависит от спина, и поэтому не дает вклада в орто-пара расщепление. Спин-орбитальное взаимодействие $\hat{V}_2$ обращается в 0 при усреднении. Усреднение $\hat{V}_4$ для $S_z = 0$ приводит к следующему выражению:

$$V(S) = \frac{4}{3}\pi\mu^2\hat{\mathbf{S}}^2\psi_0^2(0) + \frac{2a\mu^2\hat{\mathbf{S}}^2}{\lambda^2} I, \tag{7}$$

где

$$I = \int\limits_0^\infty \frac{dr}{r} \int\limits_0^1 dx(1-3x^2) e^{-r^2(1-x^2)-2\sqrt{2}rxa\lambda} \approx -\frac{1}{3} + \sqrt{2\pi}a\lambda.$$

Здесь мы учли, что $a\lambda$ – мало. Подставляя значение $\psi(0)$ (6) в уравнение (7), получаем выражение для орто-пара расщепления:

$$E_0^{\text{орто}} - E_0^{\text{пара}} = V(1) - V(0) = \sqrt{\frac{\pi H}{2}}\alpha^2 ln^2 H, \tag{8}$$

которое можно экспериментально наблюдать во многих полупроводниках. Удобно выразить орто-пара расщепление через экспериментально наблюдаемые величины E_x и E_g (они приведены в [4, 5]):

$$E_0^{\text{орто}} - E_0^{\text{пара}} = 16\sqrt{2\pi H} ln^2 H E_x^2/E_g. \tag{9}$$

ЛИТЕРАТУРА

[1] Р. Нокс. Теория экситонов (М., Мир, 1966).

[2] В. М. Агранович. Теория экситонов (М., Наука, 1968).

[3] Е. А. Андрюшин, А. П. Силин. ФТТ **35**, 1947 (1993).

[4] Е. А. Андрюшин, А. П. Силин, С. В. Шубенков. Краткие сообщения по физике ФИАН, No. 7-8, 22 (1995).

[5] А. П. Силин, С. В. Шубенков. ФТТ **42**, 25 (2000).

[6] A. A. Korolev, M. A. Liberman. Phys. Rev. Lett. **72**, 270 (1994).

[7] Б. А. Волков, Б. Г. Идлис, М. Ш. Усманов. УФН **165**, 799 (1995).

[8] П. В. Ратников, А. П. Силин. Краткие сообщения по физике ФИАН, No. 4, 47 (2007).

[9] А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий. Квантовая электродинамика (М., Наука, 1989).

[10] Б. Б. Кадомцев, В. С. Кудрявцев. Письма в ЖЭТФ **13**, 61 (1971).

[11] R. J. Elliott, R. Loudon. J. Phys. Chem. Sol. **15**, 196 (1960).

Поступила в редакцию 6 ноября 2007 г.